Курс «Введение в машинное обучение»

Логические методы машинного обучения

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

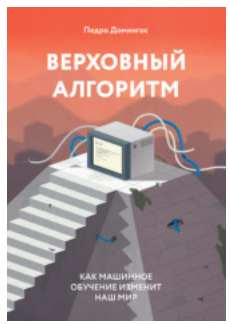
Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Введение в машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ.ФПМИ.ИС.ИАД • 10 апреля 2025

Основные научные школы машинного обучения

1. *символизм* – поиск логических закономерностей
   - Decision Tree, Rule Induction
2. *коннекционизм* – обучаемые нейронные сети
   - BackPropagation, Deep Belief Nets, Deep Learning
     CNN, ResNet, LSTM, GRU, Attention, Transformer
3. *эволюционизм* – саморазвитие сложных моделей
   - Genetic Algorithms, Genetic Programming, Symbolic Regression
4. *байесионизм* и вероятностно-статистические методы
   - MLE, EM, GLM, LR, OBC, Naive Bayes, QD, LDF
     Bayesian Networks, Bayesian Learning, Graphical Models
5. *аналогизм* – «близким объектам близкие ответы»
   - kNN, RBF, SVM, KDE, Kernel Smoothing

⊕ *композиционизм* – кооперация моделей
   - Weighted Voting, Boosting, Bagging, Stacking,
     Random Forest, Яндекс.CatBoost

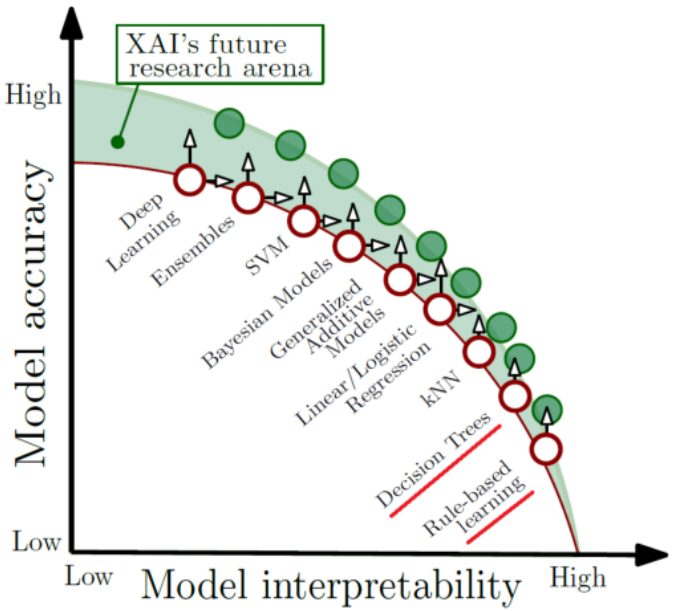


Педро Домингос. Верховный алгоритм. 2016. 336 с.

Интерпретируемость (XAI, eXplainable Artificial Intelligence)

Обучающая выборка $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$, $y_i \in Y$ — метки классов

- **Interpretability**
  — пассивная интерпретируемость внутреннего строения модели или предсказания на объекте
- **Understandability**, **Transparency**
  — понятность, самоочевидность, прозрачность строения модели



- **Explainability** — активная генерация объяснений на объекте как дополнительных выходных данных модели
- **Comprehensibility** — возможность представить выученные закономерности в виде понятного людям знания

"Do you want an interpretable model, or the one that works?"
[Yann LeCun, NIPS'17]

V.Belle, I.Papantonis. Principles and practice of explainable machine learning. 2020

Содержание

1. **Индукция правил**
   - Научная школа М. М. Бонгарда
   - Понятие закономерности
   - Алгоритмы поиска закономерностей
2. **Критерии информативности**
   - Двухкритериальный отбор правил в плоскости (p, n)
   - Логические и статистические закономерности
   - Сравнение критериев информативности
3. **Решающие деревья**
   - Обучение решающих деревьев
   - CART: деревья регрессии и классификации
   - Преобразование дерева в набор конъюнкций

Первые программы для поиска логических правил

- 1958: Программа «Открой закон» восстанавливала зависимость полным *комбинаторным перебором* формул
- 1959: Программа «Арифметика» для сокращения перебора использовала оценки *информативности*
- 1961: Программа «КоРа» перебирала *информативные тройки* признаков

Михаил Моисеевич Бонгард (1924–1971)

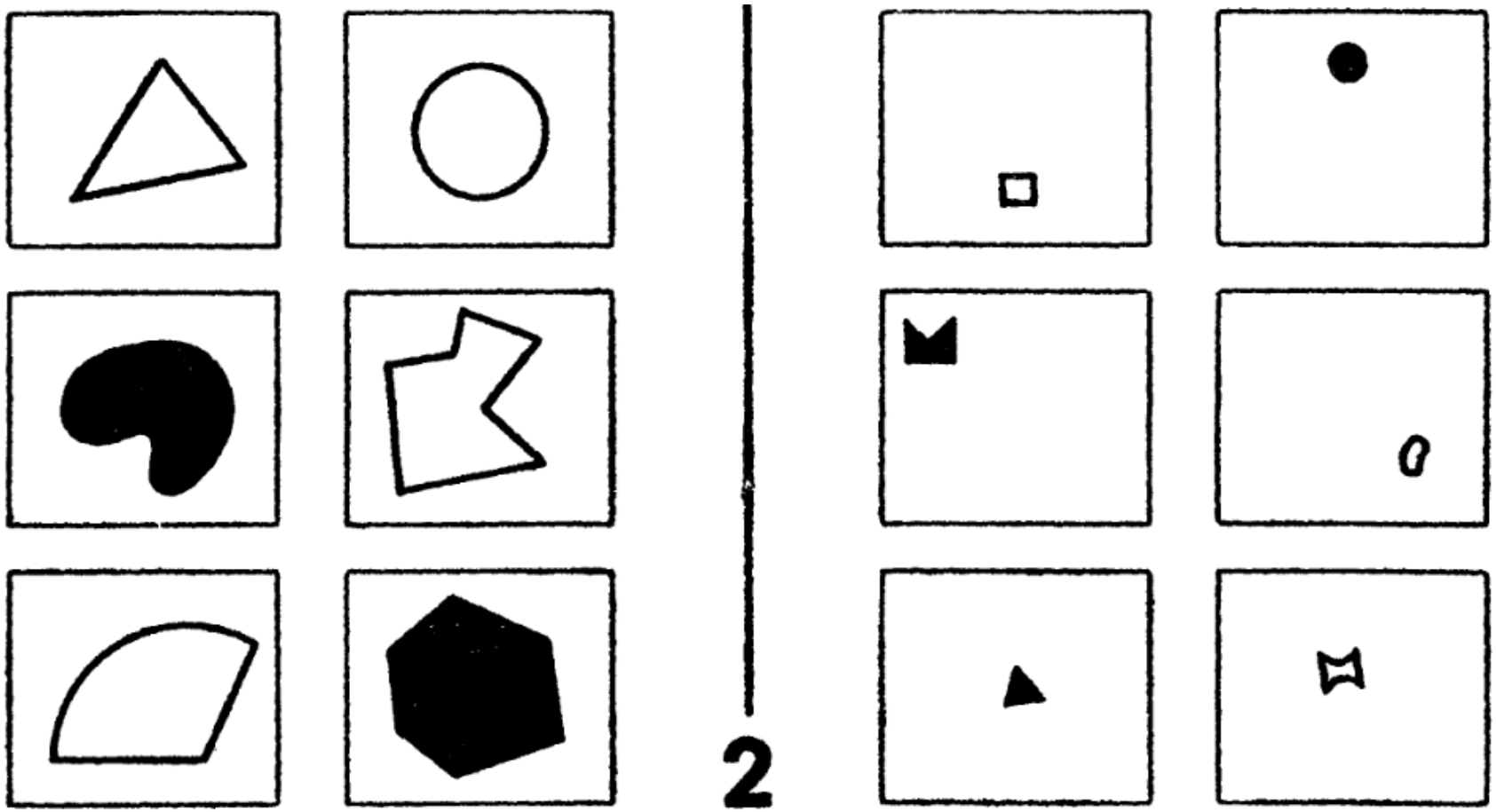
«КоРа-3»: первое применение распознавания незрительных образов для распознавания границы нефть-вода в скважине.

Введены принципы *голосования*, *скользящего контроля*, понятия *информативности* и *предрассудка* (переобучения).

Бонгард М. М., Вайнцвайг М. Н., Губерман Ш. А. Извекова М. Л., Смирнов М. С. Использование обучающейся программы для выявления нефтеносных пластов. 1966.

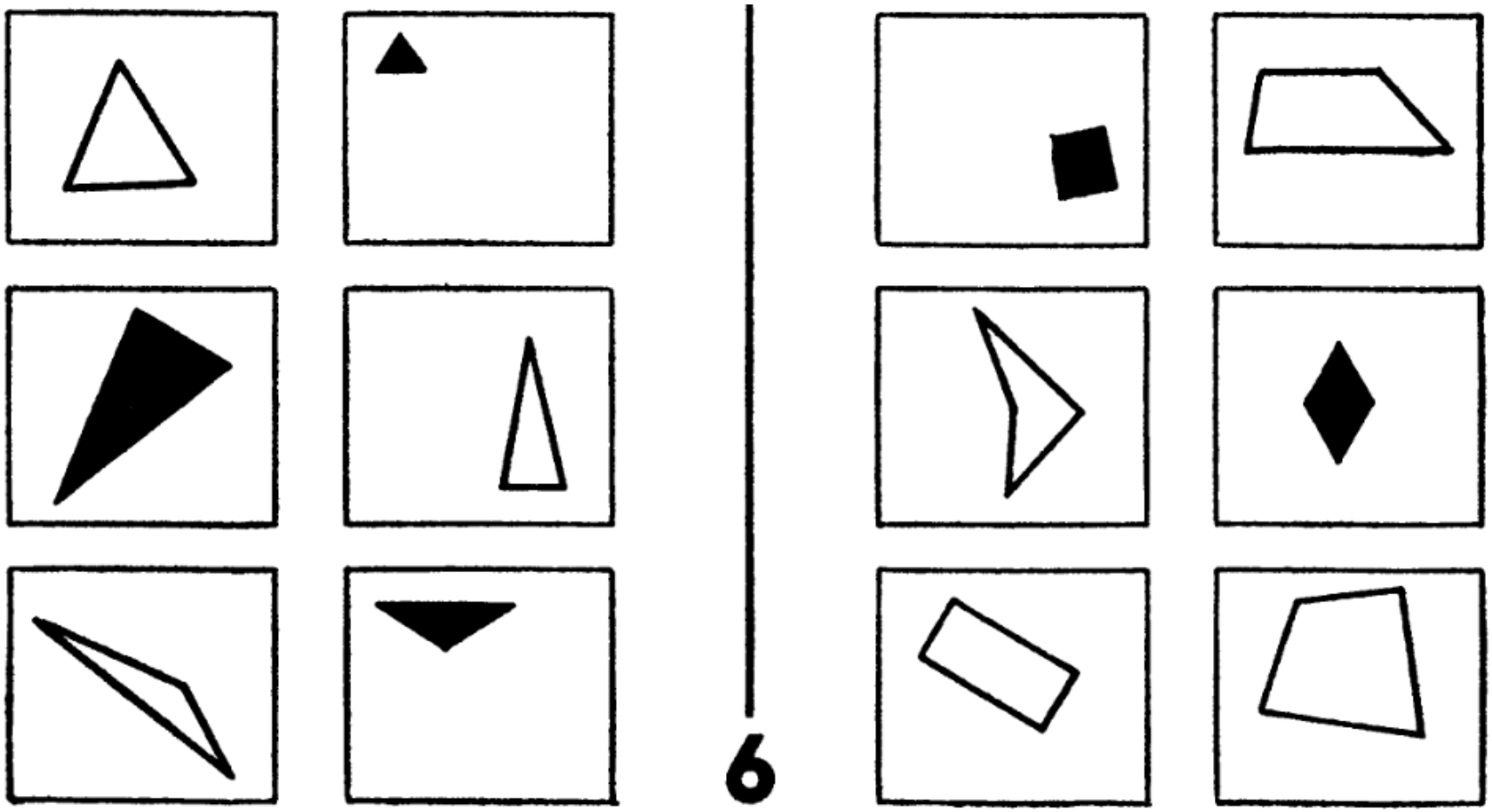
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Обучающая выборка: по 6 объектов каждого из двух классов.
Требуется найти правило классификации.



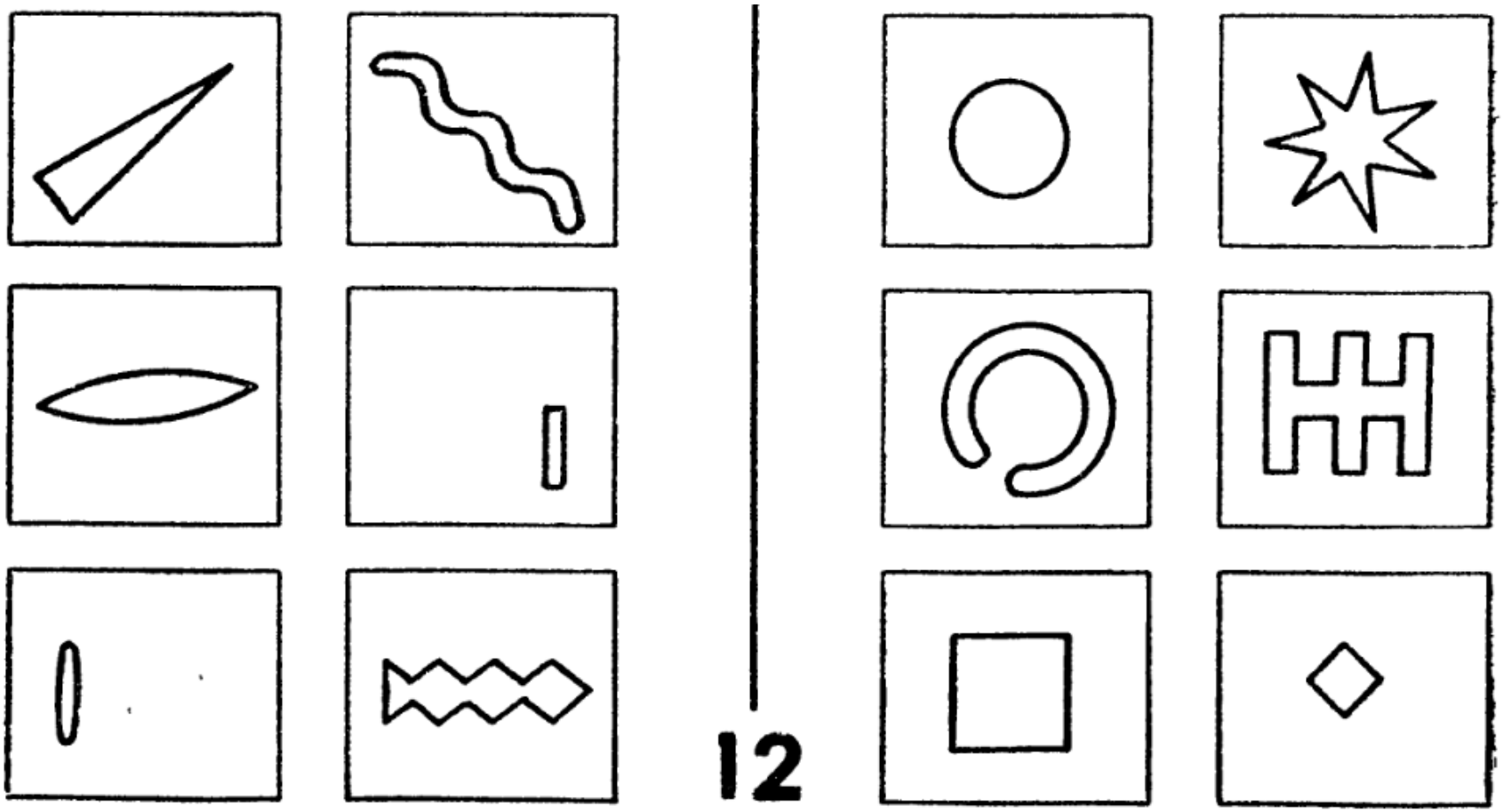
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Что даёт нам уверенность, что мы нашли верное правило?
Безошибочная классификация примеров обучающей выборки.



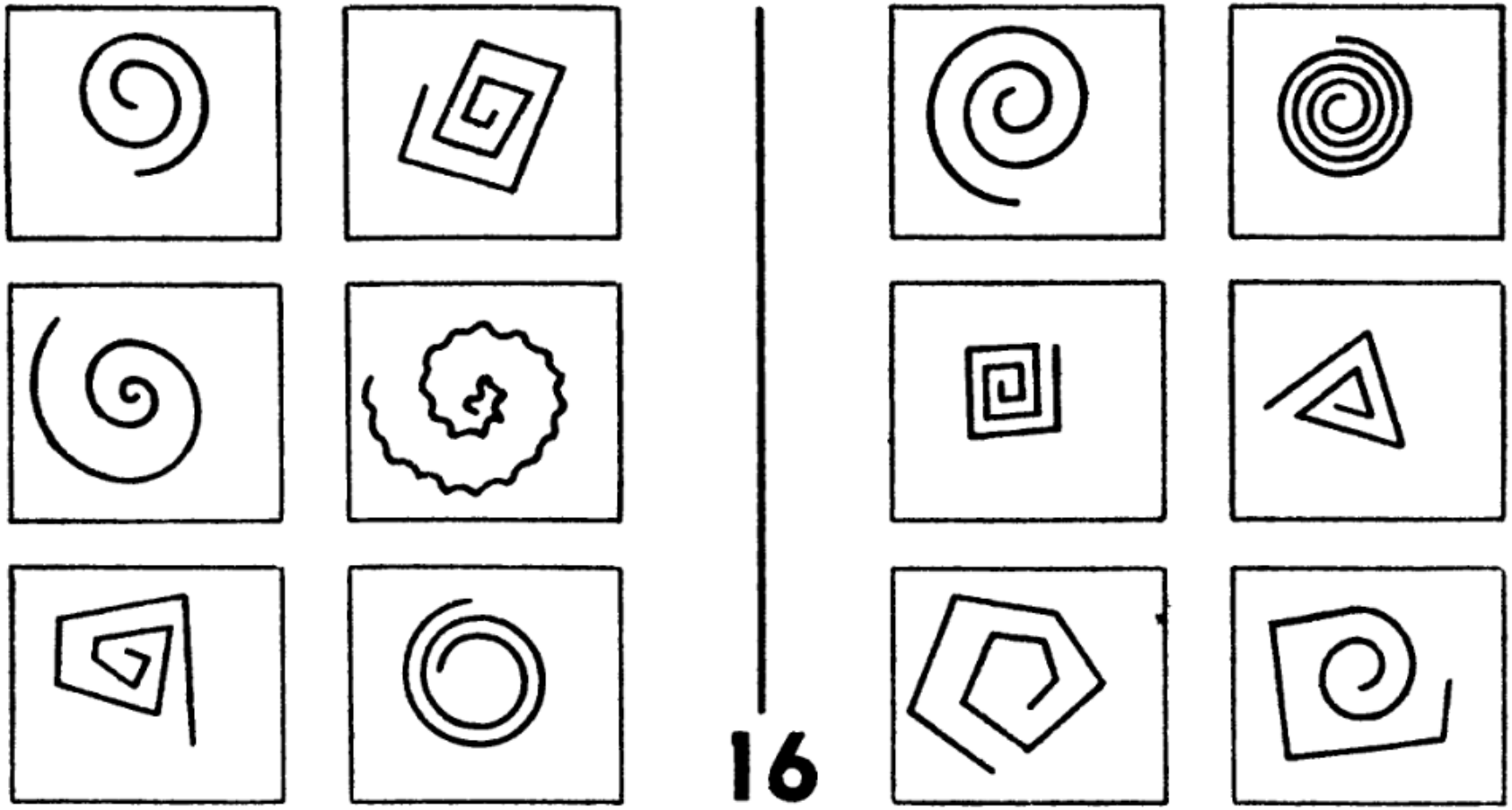
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Что ещё даёт нам уверенность, что мы нашли верное правило?
Простота, общность, изящество найденного правила.



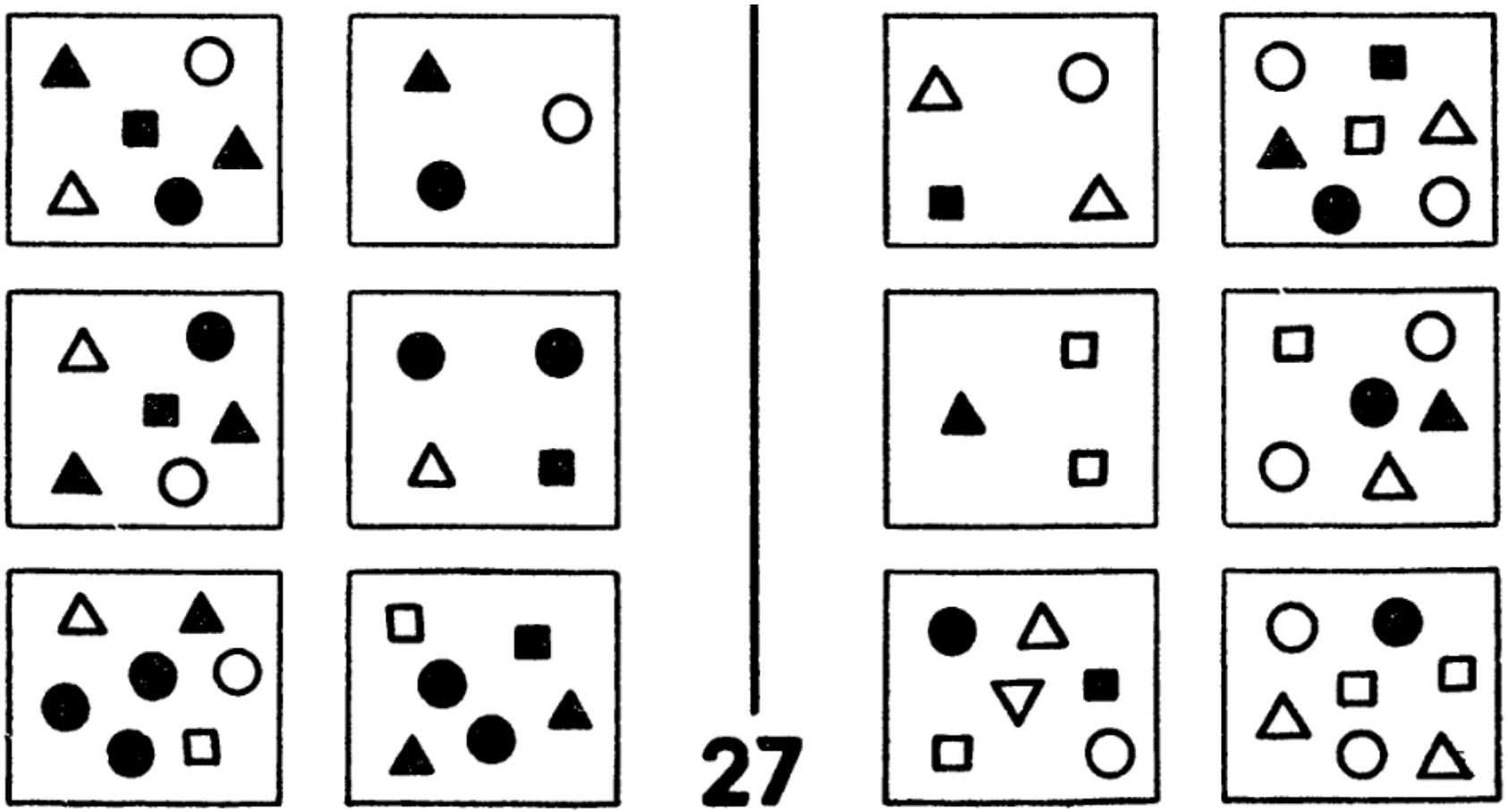
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Мы решаем эти задачи почти мгновенно. Чем мы пользуемся?
Однако для компьютера они сложны. Чего ему не хватает?



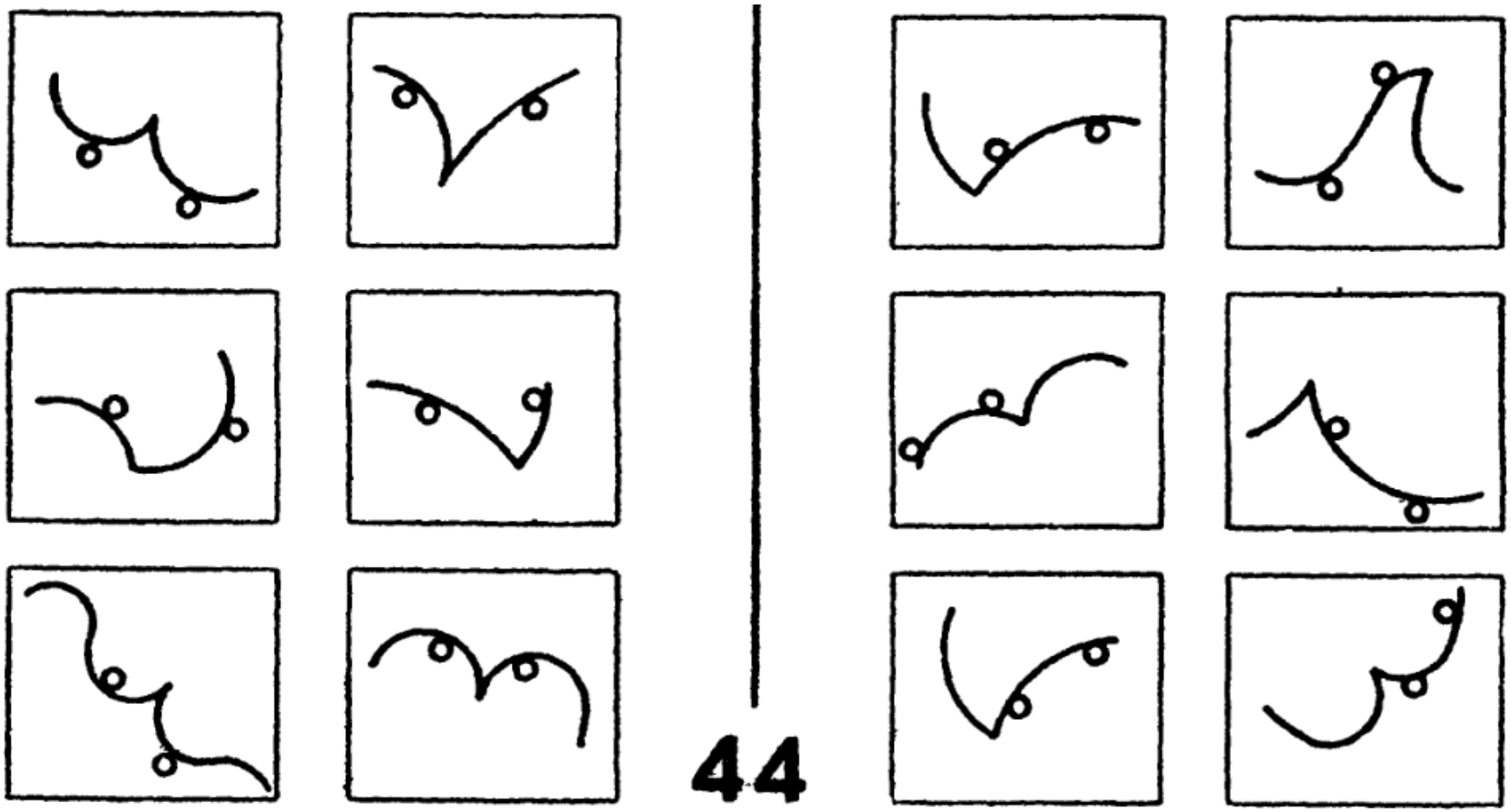
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Нужно ли закладывать знания геометрии в явном виде?
Или возможно выработать необходимые понятия на примерах?



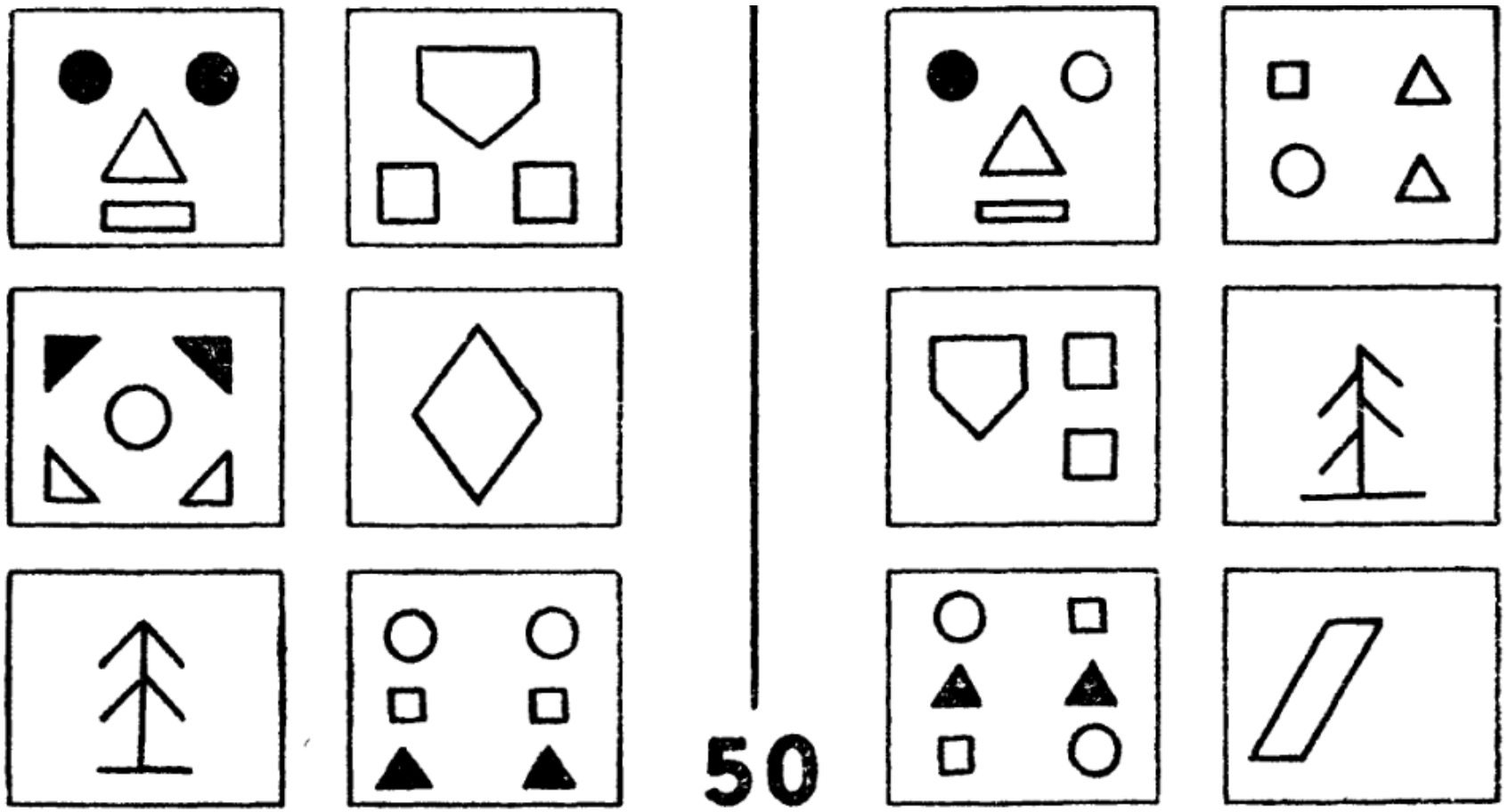
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Как вычислять полезные признаки по «сырым» данным?
Возможно ли поручить перебор признаков и моделей машине?



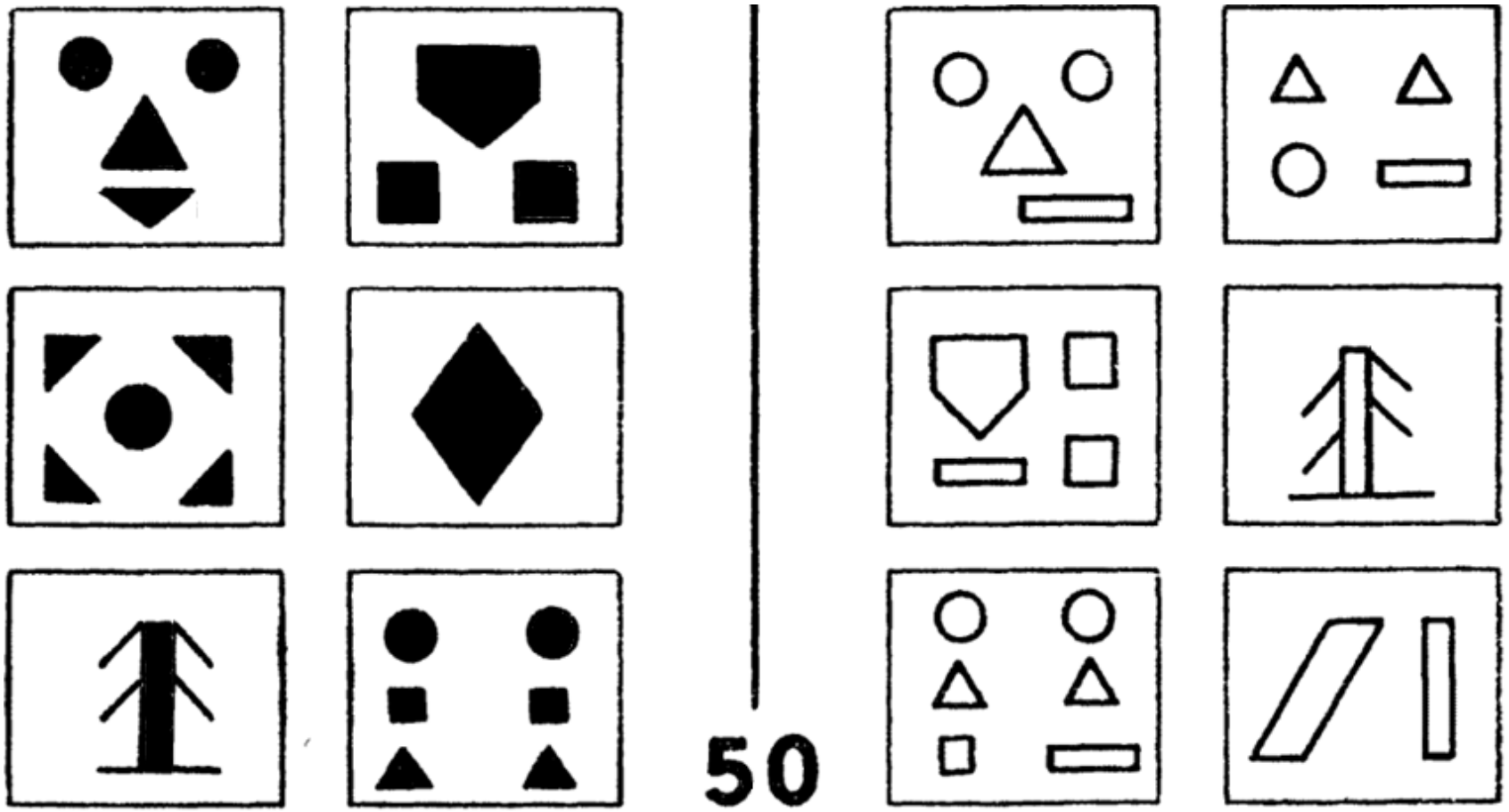
Тесты М. М. Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Каков риск вывести из данных ложное правило, *предрассудок*?
Как этот риск зависит от числа примеров и сложности правил?



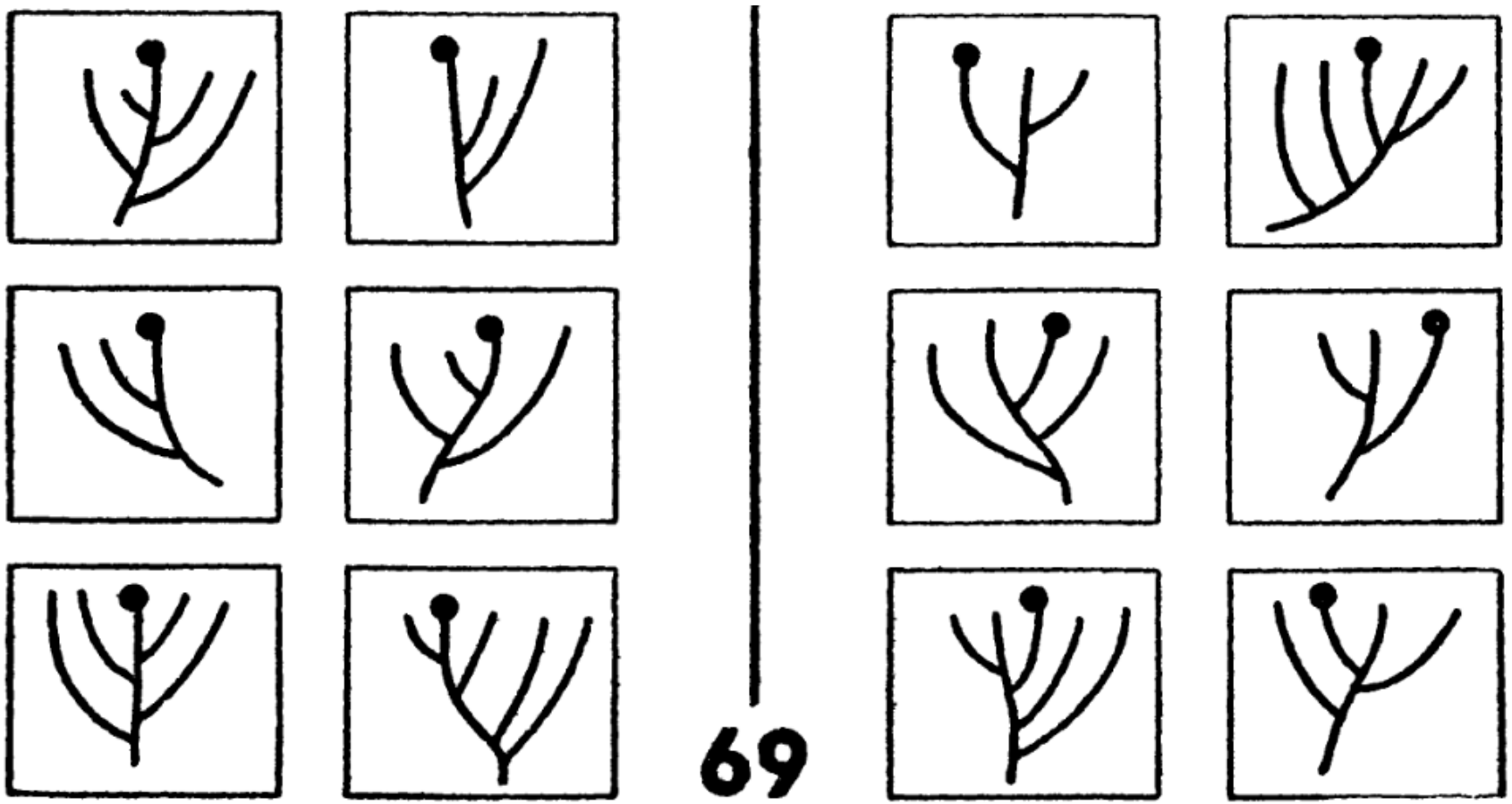
Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Какого числа примеров достаточно для выработки правила?
Что делать, если к выборке подходит много разных правил?



Тесты Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Эти вопросы составляют основу машинного обучения сегодня.
М.М.Бонгард поставил все эти проблемы в середине 60-х!



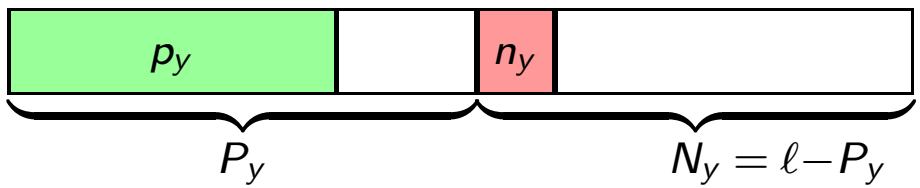
Логические закономерности в задачах классификации

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X \times Y$ — обучающая выборка, $y_i = y(x_i)$.

Логическая закономерность (правило, rule) — это предикат $R\colon X \to \{0,1\}$, удовлетворяющий двум требованиям:

1. *интерпретируемость* (понятность + простота):
   1) R записывается на естественном языке
   2) R зависит от небольшого числа признаков (не более 7)
2. *информативность* относительно одного из классов $y \in Y$:
   $p_y(R, X^\ell) = \#\{x_i \in X^\ell\colon R(x_i)=1 \text{ и } y_i=y\} \to \max;$
   $n_y(R, X^\ell) = \#\{x_i \in X^\ell\colon R(x_i)=1 \text{ и } y_i\neq y\} \to \min;$

$$\frac{p_y}{P_y} \gg \frac{n_y}{N_y}$$



Если $R(x) = 1$, то говорят «R выделяет x» (R covers x).

Требование интерпретируемости

1) $R_y(x)$ записывается на естественном языке
2) $R_y(x)$ зависит от небольшого числа признаков (не более 7)

Пример (из области медицины)

Если «возраст $>$ 60» **и** «пациент ранее перенёс инфаркт»,
то операцию не делать, риск отрицательного исхода 60%

Пример (из области кредитного скоринга)

Если «в анкете указан домашний телефон»
и «зарплата $>$ \$2000» **и** «сумма кредита $<$ \$5000»
то кредит можно выдать, риск дефолта 5%

Замечание. *Риск* — частотная оценка вероятности класса, вычисляемая, как правило, по отложенной контрольной выборке

Обучение логических классификаторов

Алгоритмов *индукции правил* (rule induction) очень много!

Основные шаги их построения — надо выбрать:

1. семейство правил, в котором будем искать закономерности
2. способ порождения правил (rule generation)
3. критерий отбора информативных правил (rule selection)
4. модель классификации с правилами в роли признаков, например, линейный классификатор (weighted voting):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{j=1}^{n_y} w_{yj} R_{yj}(x)$$

Две трактовки понятия «*логическая закономерность*» $R_y(x)$:

- обучаемый информативный интерпретируемый признак
- классификатор одного класса y с отказами

Часто используемые семейства правил

- Пороговое условие (решающий пень, decision stump):

$$R(x) = \big[f_j(x) \leqslant a_j\big] \text{ или } \big[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\big].$$

- *Конъюнкция* пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \big[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\big].$$

- *Синдром* — выполнение не менее d условий из $|J|$,
(при $d = |J|$ это конъюнкция, при $d = 1$ — дизъюнкция):

$$R(x) = \left[\sum_{j \in J} \big[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\big] \geqslant d\right],$$

Параметры J, a_j, b_j, d настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации заданного *критерия информативности*.

Часто используемые семейства правил

- *Полуплоскость* — линейная пороговая функция:

$$R(x) = \Big[\sum_{j \in J} w_j f_j(x) \geqslant w_0 \Big]$$

- *Шар* — пороговая функция близости:

$$R(x) = \big[\rho(x, x_0) \leqslant w_0 \big]$$

АВО — алгоритмы вычисления оценок [Ю. И. Журавлёв, 1971]:

$$\rho(x, x_0) = \max_{j \in J} w_j \big| f_j(x) - f_j(x_0) \big|$$

SCM — машины покрывающих множеств [M. Marchand, 2001]:

$$\rho(x, x_0) = \sum_{j \in J} w_j \big| f_j(x) - f_j(x_0) \big|^{\gamma}$$

Параметры J, w_j, w_0, x_0 настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации заданного *критерия информативности*.

Алгоритм Бонгарда «КоРа»: полный перебор троек признаков

Оценим вероятности выбрать конъюнкцию-предрассудок.

$x_i \in \{0,1\}^n$ — объекты описываются n бинарными признаками;

$P(x) = 2^{-n}$ — равномерное распределение на $\{0,1\}^n$;

$K_r(x)$ — конъюнкция ранга r, из r признаков или их отрицаний;

$|\mathscr{K}_n^r| = C_n^r 2^r$ — число различных таких конъюнкций.

$P\{K_r(x)=0\} = 1 - 2^{-r}$ — вероятность, что K_r случайно ложна;

$P\{K_r(X^\ell)=0\} = \prod_i P\{K_r(x_i)=0\} = \left(1-2^{-r}\right)^\ell$ — вероятность, что K случайно ложна на всех объектах из $X^\ell = (x_1, \ldots, x_\ell)$.

Верхняя оценка вероятности, что в результате поиска $K_r \in \mathscr{K}_n^r$ найденная K_r окажется случайно ложной на выборке X^ℓ:

$$\mathsf{P}\{\exists K_r\colon K_r(X^\ell)=0\} = \mathsf{P}\Big(\bigcup_{K_r}\{K_r(X^\ell)=0\}\Big) \leqslant \quad \text{неравенство Буля (union bound)}$$

$$\leqslant \sum_{K_r} \mathsf{P}\{K_r(X^\ell)=0\} = C_n^r 2^r \left(1-2^{-r}\right)^\ell.$$

Закревский Аркадий Дмитриевич. Логика распознавания. Минск, 1988.

Оценка вероятности выбрать конъюнкцию-предрассудок

Верхняя оценка вероятности $\mathrm{P}(r)$ найти случайно ложную конъюнкцию заданного ранга r, при $\ell = 200$, $n = 100$:

r	P	r	P
1	$1.24 \cdot 10^{-58}$	4	$1.56 \cdot 10^{2}$
2	$2.04 \cdot 10^{-21}$	5	$4.21 \cdot 10^{6}$
3	$3.26 \cdot 10^{-6}$	6	$3.27 \cdot 10^{9}$

Зависимость граничного значения r, после которого резко увеличивается верхняя оценка вероятности $\mathrm{P}(r)$:

n	$\ell =$ 20	50	100	200	500	1000
10	1	2	3	4	5	6
30	1	2	2	3	4	5
100	1	1	2	3	4	5

Закревский Аркадий Дмитриевич. Логика распознавания. Минск, 1988.

Мета-эвристики для поиска информативных правил

Вход: обучающая выборка X^ℓ;
Выход: множество закономерностей Z;

инициализировать начальное множество правил Z;
повторять
  $Z' :=$ множество *локальных модификаций* правил из Z;
  $Z :=$ наиболее *информативные* правила из $Z \cup Z'$;
пока правила продолжают улучшаться;
выход Z;

Частные случаи (см. лекцию про методы отбора признаков):
— стохастический локальный поиск (stochastic local search)
— генетические (эволюционные) алгоритмы
— усечённый поиск в ширину (beam search)
— поиск в глубину (метод ветвей и границ)

Локальные модификации правил

Пример. Семейство конъюнкций пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \left[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j \right].$$

Локальные модификации конъюнктивного правила:

- добавление признака f_j в J с варьированием порогов a_j, b_j
- удаление признака f_j из J
- варьирование одного из порогов a_j и b_j
- варьирование обоих порогов a_j, b_j одновременно

При удалении признака (pruning) информативность обычно оценивается по контрольной выборке (hold-out)

Вообще, для оптимизации множества J подходят те же методы, что и для отбора признаков (feature selection)

Обучение классификатора на закономерностях

Взвешенное голосование (Weighted Voting):
много-классовый линейный классификатор с весами w_{yt}
(возможна L_1-регуляризация для отбора закономерностей)

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_{yt} R_{yt}(x)$$

Простое голосование (Simple Voting, комитет большинства):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \frac{1}{T_y} \sum_{t=1}^{T_y} R_{yt}(x)$$

Решающий список (Majority Voting, комитет старшинства):
обучаемая *система продукций* — правил «**если** $R_{yt}(x)$ **то** y»

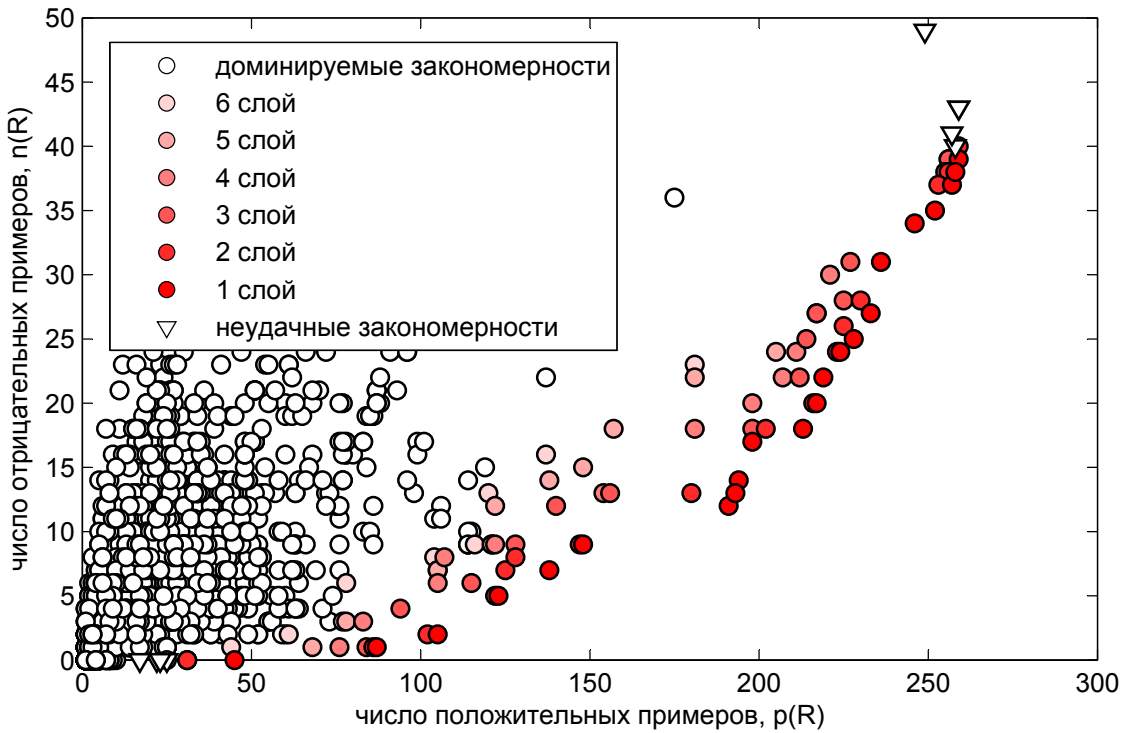
для всех $t = 1, \ldots, T$: **если** $R_{yt}(x) = 1$ **то вернуть** y;

Двухкритериальный отбор закономерностей в плоскости (p, n)

позитивные: $p_y(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i=y\} \to \max;$

негативные: $n_y(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i\neq y\} \to \min;$

Парето-фронт — множество неулучшаемых закономерностей (точка неулучшаема, если правее и ниже неё точек нет)



UCI:german

Логические и статистические закономерности

Предикат $R(x)$ — *логическая закономерность* класса $y \in Y$:

$$\text{Precision} = \frac{p_y(R)}{p_y(R) + n_y(R)} \geqslant \pi_0 \qquad \text{Recall} = \frac{p_y(R)}{P_y} \geqslant \rho_0$$

Если $n_y(R) = 0$, то R — *непротиворечивая закономерность*

Предикат $R(x)$ — *статистическая закономерность* класса $y \in Y$:

$$\text{IStat}\big(p_y(R), n_y(R)\big) \geqslant \sigma_0$$

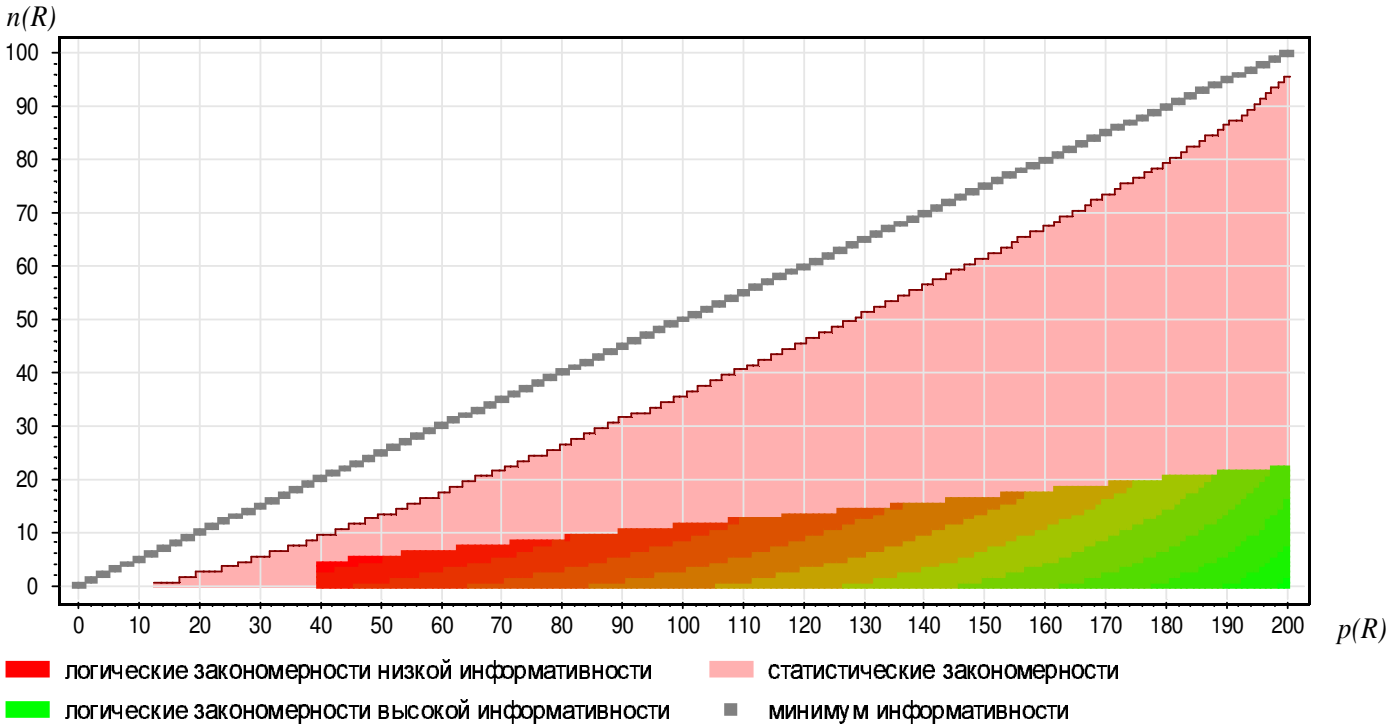
IStat — минус-log вероятности реализации (p, n) при условии нулевой гипотезы, что $y(x)$ и $R(x)$ — независимые случайные величины (точный тест Фишера, Fisher's Exact Test):

$$\text{IStat}(p, n) = -\frac{1}{\ell} \log_2 \frac{C_P^p C_N^n}{C_{P+N}^{p+n}} \;\to\; \max,$$

где $P = \#\{x_i : y_i = y\}$, $N = \#\{x_i : y_i \neq y\}$, $C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$

Критерии поиска закономерностей в плоскости (p, n)

Логические закономерности: Precision $\geqslant 0.9$, Recall $\geqslant 0.2$
Статистические закономерности: IStat $\geqslant 3$



$P = 200$

$N = 100$

Логический критерий удобнее для финального отбора правил;
статистический критерий — в процессе модификации правил

Зоопарк критериев информативности

Очевидные, но не вполне адекватные критерии:

- $I(p,n) = \frac{p}{p+n} \to \max$ (precision)
- $I(p,n) = p/P \to \max$ (recall)
- $I(p,n) = p/P - n/N \to \max$ (relative accuracy)

Адекватные, но не очевидные критерии:

- энтропийный критерий прироста информации:
  $$\mathrm{IGain}(p,n) = h\Big(\frac{P}{\ell}\Big) - \frac{p+n}{\ell} h\Big(\frac{p}{p+n}\Big) - \frac{\ell-p-n}{\ell} h\Big(\frac{P-p}{\ell-p-n}\Big) \to \max$$
  где $h(q) = -q \log_2 q - (1-q)\log_2(1-q)$
- критерий Джини (Gini impurity):
  $\mathrm{IGain}(p,n)$ при $h(q) = 4q(1-q)$
- критерий бустинга и его нормированный вариант:
  $\sqrt{p} - \sqrt{n} \to \max$, $\sqrt{p/P} - \sqrt{n/N} \to \max$

J.Fürnkranz, P.Flach. ROC'n'rule learning – towards a better understanding of covering algorithms // Machine Learning, 2005.

Нетривиальность проблемы свёртки двух критериев

Пример: в каждой паре правил первое гораздо лучше второго, однако простые эвристики не различают их по качеству (при $P = 200,\ N = 100$).

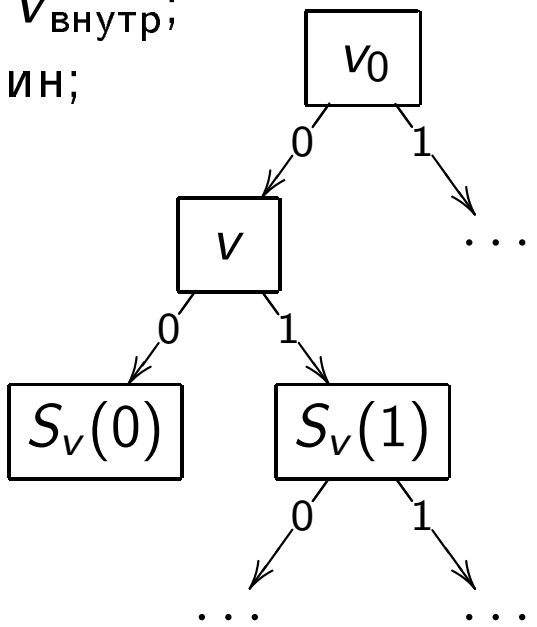
p	n	$p-n$	$p-5n$	$\frac{p}{P}-\frac{n}{N}$	$\frac{p}{n+1}$	IStat$\cdot\ell$	IGain$\cdot\ell$	$\sqrt{p}-\sqrt{n}$
50	0	**50**	50	0.25	50	22.65	23.70	7.07
100	50	**50**	−150	0	1.96	2.33	1.98	2.93
50	9	41	**5**	0.16	**5**	7.87	7.94	4.07
5	0	5	**5**	0.03	**5**	2.04	3.04	2.24
100	0	**100**	100	**0.5**	100	52.18	53.32	10.0
140	20	**120**	40	**0.5**	6.67	37.09	37.03	7.36

Замечание. Критерии IStat и IGain асимптотически эквивалентны: IStat$(p, n) \to$ IGain(p, n) при $\ell \to \infty$

Определение решающего дерева (Decision Tree)

Решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся *деревом* (связным ациклическим графом) с корнем $v_0 \in V$ и множеством вершин $V = V_{\text{внутр}} \sqcup V_{\text{лист}}$;

$f_v : X \to E(f_v)$ — дискретный признак, $\forall v \in V_{\text{внутр}}$;
$S_v : E(f_v) \to V$ — множество дочерних вершин;
$y_v \in Y$ — метка класса, $\forall v \in V_{\text{лист}}$;



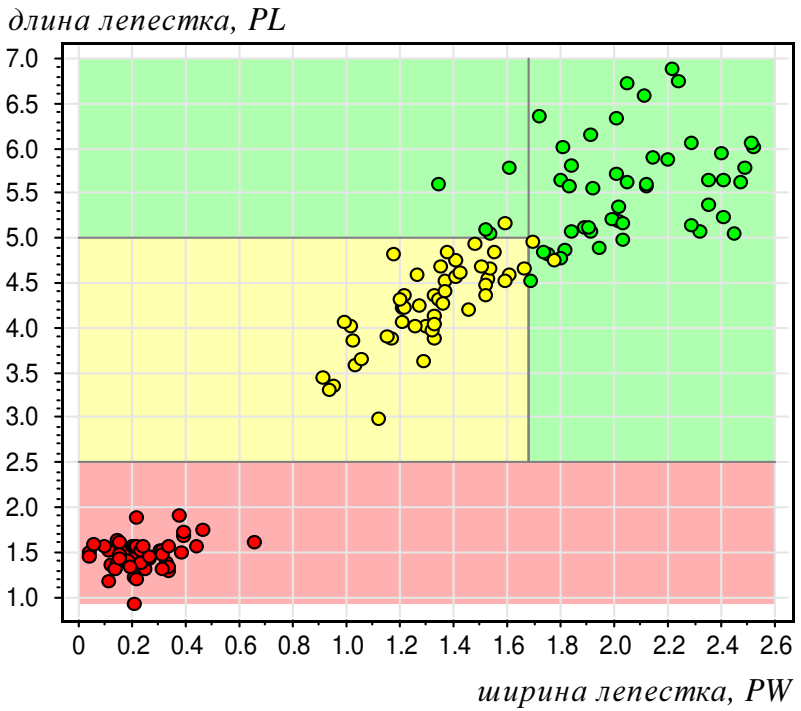
$v := v_0$;
пока $(v \in V_{\text{внутр}})$: $v := S_v(f_v(x))$;
выход $a(x) := y_v$;

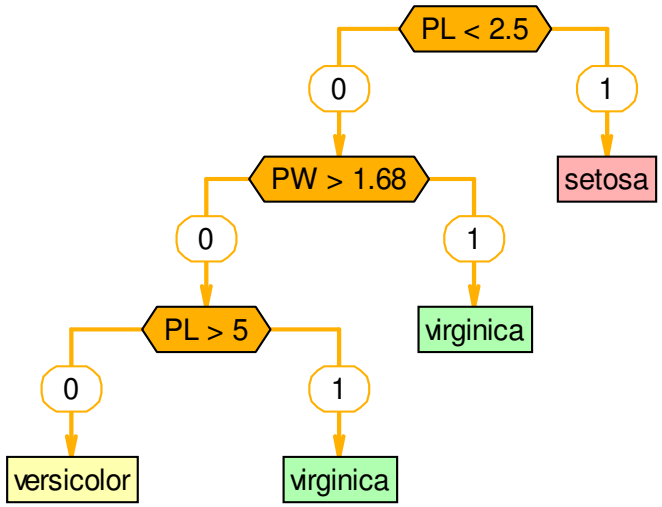
Чаще всего используются бинарные признаки вида $f_v(x) = [f_j(x) \geqslant a]$

Если $E(f_v) = \{0, 1\}$, то решающее дерево называется *бинарным*

Пример решающего дерева

Задача Фишера о классификации цветков ириса на 3 класса, в выборке по 50 объектов каждого класса, 4 признака.





На графике: в осях двух самых информативных признаков (из 4) два класса разделились без ошибок, на третьем 3 ошибки.

CART: деревья регрессии и классификации

Обобщение на случай *регрессии*: $Y = \mathbb{R}$, $y_v \in \mathbb{R}$,

$$Q(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \big(a(x_i) - y_i\big)^2 \to \min_a$$

Пусть U — множество объектов x_i, дошедших до вершины v.
Аналитическое МНК-решение y_v в вершине $v \in V_{\text{лист}}$:

$$y_v = \arg\min_{y \in Y} \sum_{x_i \in U} \big(y - y_i\big)^2 = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} y_i$$

Критерий ветвления для выбора признака в вершине $v \in V_{\text{внутр}}$:

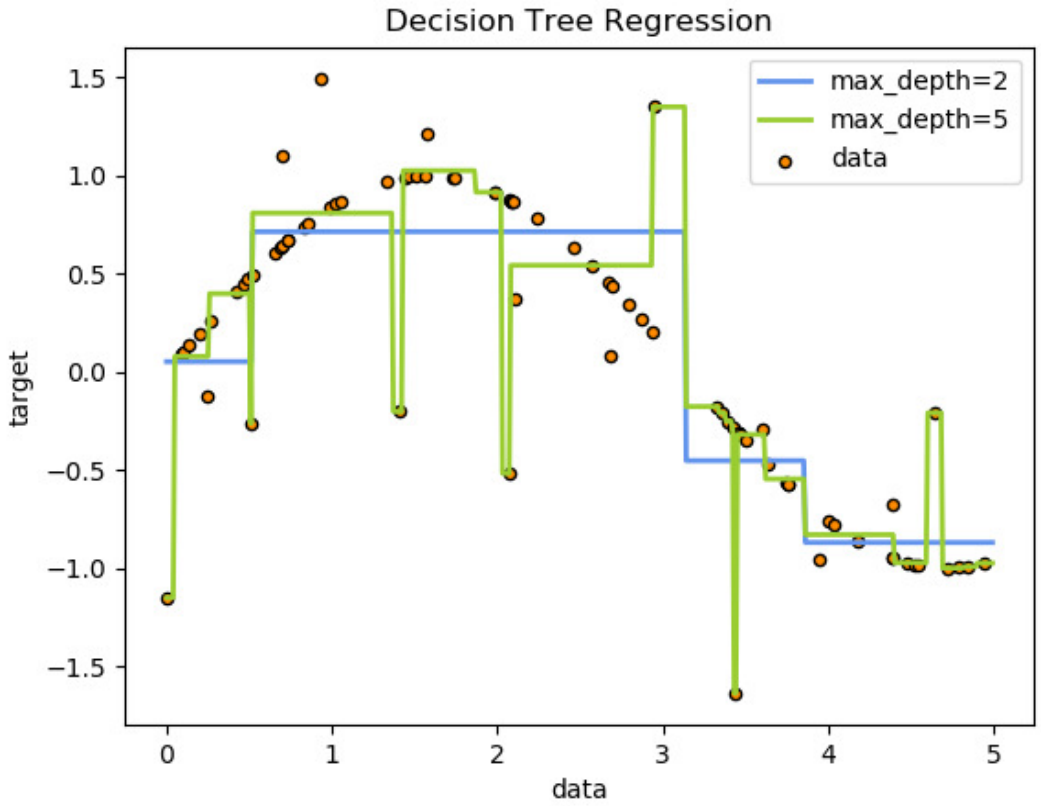
$$f_v = \arg\min_f \sum_{z \in E(f)} \min_{y \in Y} \sum_{x_i \in U} [f(x_i) = z] \big(y - y_i\big)^2$$

Дерево регрессии $a(x)$ — это кусочно-постоянная функция.

Leo Breiman et al. Classification and regression trees. 1984.

Пример. Деревья регрессии различной глубины

Чем сложнее дерево (чем больше его глубина), тем выше влияние шумов в данных и выше риск переобучения.



scikit-learn.org/stable/auto_examples/tree/plot_tree_regression.html

CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева:

$$Q_\alpha(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \big(a(x_i) - y_i\big)^2 + \alpha |V_{\text{лист}}| \to \min_a$$

Дерево — линейный классификатор над бинарными признаками:

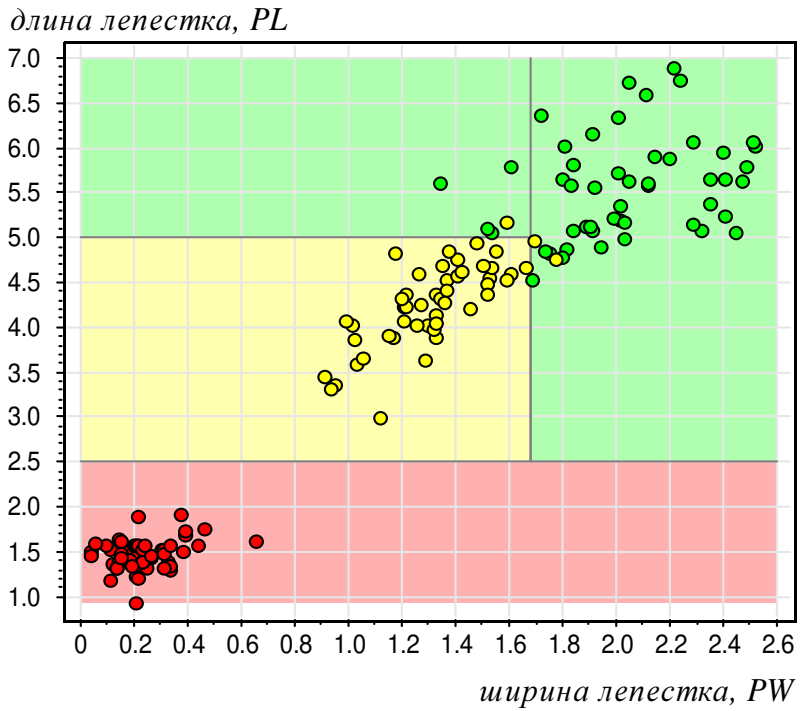
$$a(x) = \sum_{v \in V_{\text{лист}}} w_v B_v(x),$$

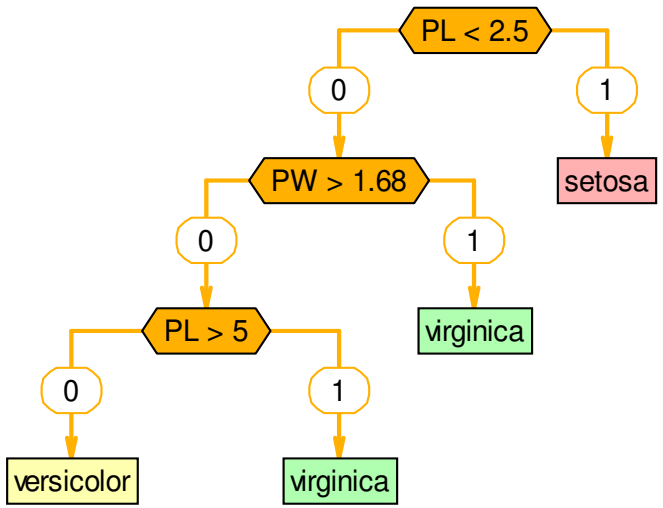
$B_v(x) = \big[x$ прошёл путь от корня v_0 до листа $v\big]$;
w_y — вес признака B_v, среднее y_i по всем x_i: $B_v(x) = 1$.

При увеличении α дерево последовательно упрощается.
Причём последовательность вложенных деревьев единственна.
Из неё выбирается дерево с min ошибкой на тесте (Hold-Out).

Leo Breiman et al. Classification and regression trees. 1984.

Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций





setosa	$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$
virginica	$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$
virginica	$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$
versicolor	$r_4(x) = [PL > 2.5] \wedge [PL \leqslant 5] \wedge [PW < 1.68]$

Резюме по логическим методам

- Эмпирическая индукция — вывод знаний из данных:
  - индукция правил (Rule Induction)
  - решающие деревья, списки, таблицы
- Преимущества логических методов:
  - интерпретируемость
  - возможность обработки разнотипных данных
  - возможность обработки данных с пропусками
- Недостатки логических методов:
  - ограниченное качество классификации
  - перебор правил либо долгий, либо неполный
  - решающие деревья неустойчивы, склонны к переобучению